

Математика и математическое моделирование. 2020.  
№ 06. С. 28 – 36.

DOI: [10.24108/mathm.0620.0000243](https://doi.org/10.24108/mathm.0620.0000243)



© А.Ю. Ветлужский, 2020

# Математика Математическое моделирование

Сетевое научное издание

<http://mathmelpub.ru>

ISSN 2412-5911

УДК 519

## Метод самосогласованных уравнений для решения задач дифракции волн на системах рассеивателей

Ветлужский А.Ю.<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Институт физического материаловедения СО РАН, Улан-Удэ, Россия

\* [vay@ipms.bscnet.ru](mailto:vay@ipms.bscnet.ru)

Рассматривается один из численных методов решения задач рассеяния электромагнитных волн на системах, образованных параллельно ориентированными цилиндрическими элементами – двумерных фотонных кристаллах. Особенностью метода является использование аналитических выражений, описывающих дифракцию на одиночном элементе системы. Входящие в эти выражения неизвестные амплитудные коэффициенты, учитывающие взаимное влияние рассеивателей, определяются путем построения и решения систем самосогласованных уравнений. В отличие от большинства численных методов данный подход при его использовании позволяет получить информацию об амплитудно-фазовых или спектральных характеристиках поля только в локальных точках структуры. Отсутствие необходимости определения параметров поля во всей области пространства, занимаемой рассматриваемой многоэлементной системой, обуславливает высокую эффективность данного метода. В работе сопоставляются результаты расчета спектров пропускания двумерных фотонных кристаллов рассматриваемым методом с экспериментальными данными и численными результатами, полученными с использованием других подходов.

**Ключевые слова:** численные методы, дифракция, рассеяние, фотонные кристаллы, спектры пропускания

Представлена в редакцию: 15.11.2020, исправлена 29.11.2020

## Введение

Одним из интересных объектов исследований в оптике и радиофизике последних десятилетий, с которым связывают разнообразные перспективы практического применения, являются фотонные кристаллы (ФК) – среды с периодически меняющейся в одном, в двух или в трех направлениях в пространстве диэлектрической проницаемостью с характерным масштабом периодичности, сопоставимым с длиной волны электромагнитного излучения. Современная концепция ФК была сформулирована в работе [1]. Ключевое понятие теории фотонных кристаллов – запрещенная зона, означающее полосу частот, в пределах которой

подавляется распространение электромагнитных волн через ФК. Физическая природа такого подавления заключается в брэгговском рассеянии излучения на периодических неоднородностях среды. Таким образом, спектр пропускания любого ФК представляет собой чередование запрещенных и разрешенных зон, при этом в диапазоне последних излучение практически свободно проходит через ФК.

Области практического применения ФК существенным образом зависят от характера пространственной периодичности кристалла. Одномерные ФК могут, например, рассматриваться как основа эффективных резонаторов радио- и оптического диапазонов [2], двумерные кристаллы – как базовый элемент различного рода волноводных и преобразующих световые потоки устройств [3], трехмерные, способные к формированию полных запрещенных зон кристаллы могут обеспечить полный контроль спонтанного испускания фотонов, что позволит, в принципе, создавать беспороговые лазеры [4]. Однако, несмотря на уникальные свойства трехмерных структур и проводимые в последние годы их всесторонние теоретические исследования, их непосредственная практическая реализация для использования в оптическом диапазоне все еще представляет значительные трудности. Поэтому двумерные ФК, создание которых современными технологическими методами не составляет сложностей, а интересные физические свойства представляются на сей день даже более разнообразными, чем у их трехмерных аналогов, вызывают особый интерес в силу возможности непосредственного практического применения.

Теоретические методы, использовавшиеся для изучения свойств ФК на всех этапах истории их исследований, весьма разнообразны. Поскольку задача возбуждения ФК электромагнитным полем – типичная дифракционная задача, изначально использовались хорошо развитые к моменту появления работы [1] применительно к задачам рассеяния на дифракционных решетках различной размерности аналитические и численно-аналитические методы (например, методы матриц передачи и матриц рассеяния, исходящие из физической постановки проблемы, метод полуобращения матричных операторов и модифицированный метод вычетов, оперирующие математической формулировкой краевой дифракционной задачи и т.д. [5]). По мере развития вычислительной техники все большую популярность приобретали строгие численные методы. К числу последних относятся и широко используемые в последние годы прямые методы численного решения уравнений Максвелла – метод конечных элементов [6] и метод конечных разностей во временной области [7].

На наш взгляд, общим недостатком упомянутых численных методов при их использовании для решения дифракционных задач рассеяния волн на системах тел является получение подчас избыточного количества информации, и, как следствие, высокие требования к вычислительным ресурсам и значительное время, требуемое для расчетов. Действительно, т.к. данные методы относятся к сеточным методам решения дифференциальных уравнений, применяя их к задаче возбуждения ФК произвольной геометрии, получаем полное представление об амплитудно-фазовом распределении поля во всей рассматриваемой области пространства. Однако, многие электродинамические задачи, связанные с ФК, огра-

ничиваются необходимостью получения амплитудных спектров пропускания таких структур в заданной полосе частот либо определения интенсивности поля в некоторых ключевых точках ФК без анализа его характеристик в других областях. Рассмотрение простого в алгоритмизации, не требовательного к вычислительным ресурсам численного метода, реализующего такой подход, является целью настоящей работы.

## 1. Метод самосогласованных уравнений

Данный метод был впервые предложен в [8] для анализа дифракции волн на параллельных цилиндрах. Позднее использовался в [9] для получения аналитических выражений, описывающих процессы рассеяния волн на двух цилиндрических и сферических телах. Принципиальным недостатком метода являлась невозможность его практического применения для систем более чем из двух тел из-за громоздкости получающихся выражений. Для решения дифракционных задач, касающихся систем большого числа рассеивателей, он начал применяться лишь с середины 90-х годов прошлого века по мере развития вычислительной техники [10, 11].

Рассмотрим его на примере задачи возбуждения системы  $N$  параллельных диэлектрических бесконечно протяженных цилиндров кругового сечения нитью синфазного (электрического или магнитного) тока, ориентированной вдоль элементов структуры. Запишем решение двумерного неоднородного уравнения Гельмгольца в цилиндрической системе координат для поля, рассеянного произвольным  $j$ -ым цилиндром ( $j = 1, 2, \dots, N$ ), в виде разложения по азимутальным гармоникам:

$$u_{\text{рас}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} P_{mj} H_m^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) e^{in\varphi_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_j}}, \quad (1)$$

где  $k$  – волновое число,  $H_m^{(1)}$  – функция Ханкеля первого рода  $m$ -ого порядка,  $\varphi_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_j}$  – угол, образованный вектором  $\mathbf{r} - \mathbf{r}_j$  и осью  $x$  системы координат (рис. 1).

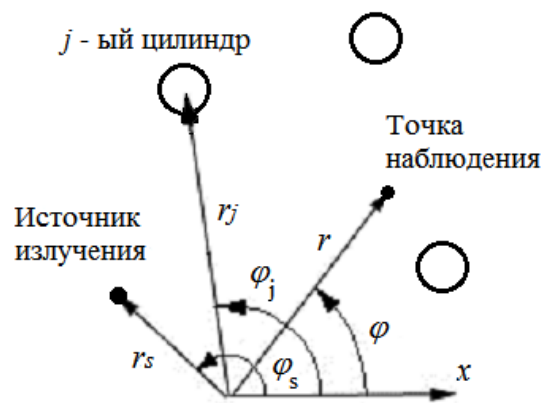


Рис. 1. Концептуальная схема рассматриваемой задачи.

Полное падающее на некоторый  $i$ -ый цилиндр поле ( $i = 1, 2, \dots, N, i \neq j$ ) представим в виде суммы поля источника и полей, рассеянных остальными элементами системы:

$$u_{\text{пад}}^i(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \sum_{j=1, j \neq i}^N u_{\text{рас}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j). \quad (2)$$

Это же поле можно описать в виде разложения, аналогичного (1):

$$u_{\text{пад}}^i(\mathbf{r}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_{mj} J_m(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) e^{in\varphi_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_j}}. \quad (3)$$

Радиальная зависимость поля здесь выражена через функцию Бесселя  $m$ -ого порядка, поскольку она не имеет особенностей при  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_j$ .

Для определения неизвестных коэффициентов  $P_{mj}$  и  $B_{mj}$  выразим рассеянное поле  $u_{\text{рас}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j)$  для каждого  $j$ -ого цилиндра через волновые функции  $i$ -ого элемента ( $i \neq j$ ). Для этого используем теорему сложения для цилиндрических функций [12] (рис. 2):

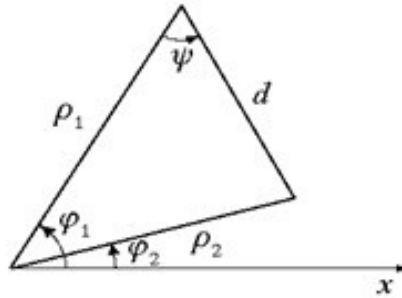


Рис. 2. Геометрическая иллюстрация к теореме сложения для цилиндрических функций.

$$Z_m(\alpha d) e^{im\psi} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} Z_{m+k}(\alpha \rho_1) J_k(\alpha \rho_2) e^{ik(\varphi_1 - \varphi_2)}, \quad (4)$$

где  $\rho_1 > \rho_2$ ,  $Z$  - произвольная цилиндрическая функция.

Применяя (4) к (1) получаем:

$$u_{\text{рас}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_{mj,i} J_m(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) e^{in\varphi_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_i}}, \quad (5)$$

где

$$C_{mj,i} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} P_{lj} H_{l-m}^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) e^{i(l-n)\varphi_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_j}}. \quad (6)$$

Для дальнейших преобразований поле источника представим в аналогичной формулировке – в виде разложения по волновым функциям  $i$ -ого цилиндра:

$$u_0(\mathbf{r}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} D_{mi} J_m(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) e^{in\varphi_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_i}}, \quad (7)$$

где коэффициенты  $D_{mi}$  связаны с известной комплексной амплитудой поля источника  $A_0$  и местоположением последнего, определяемым вектором  $\mathbf{r}_s$ :

$$D_{mj} = A_0 H_m^{(1)}(k|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_s|) e^{im\varphi_{\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_s}}.$$

Подставляя выражения (3), (5) и (7) в (2), получим:

$$B_{mi} = D_{mi} + \sum_{j=1, j \neq i}^N C_{mj,i}. \quad (8)$$

В последнем выражении неизвестными являются два коэффициента:  $B_{mi}$  и  $P_{lj}$ . Для их определения необходимо установить между ними дополнительное соотношение, что достигается решением простейшей задачи дифракции волн на одиночном цилиндре. Удовлетворяя граничным условиям на его поверхности, получаем хорошо известное выражение (ограничимся его формулировкой для  $E$  (TM) волн, т.е. для параллельной ориентации вектора напряженности электрического поля  $\mathbf{E}$  относительно цилиндров):

$$\frac{P_{mi}}{B_{mi}} = \frac{nJ_m(ka)J'_m(nka) - J'_m(ka)J_m(nka)}{J_m(nka)H_m^{(1)'}(ka) - nH_m^{(1)}(ka)J'_m(nka)}. \quad (9)$$

Здесь  $n$  – показатель преломления материала цилиндра.

Применяя последовательно описанную процедуру ко всем цилиндрам и учитывая (6) и (9), получаем систему  $N$  самосогласованных линейных неоднородных уравнений (8), в которой каждый неизвестный коэффициент  $P_{mi}$ , описывающий возбуждение соответствующего цилиндра, определяется через коэффициенты, характеризующие состояние других цилиндров системы. Разрешая систему стандартными методами, окончательно находим поле в произвольной точке пространства с использованием следующего выражения:

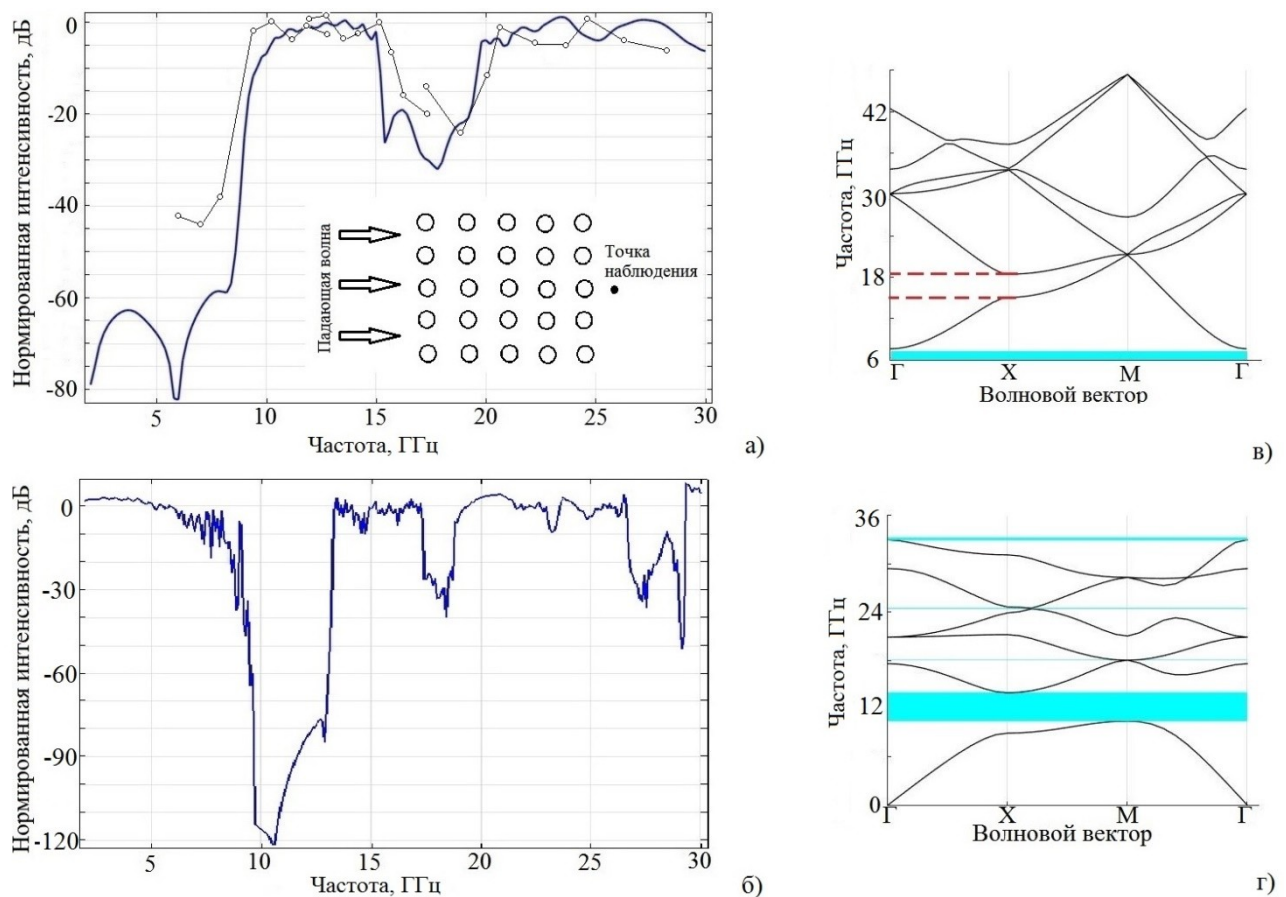
$$u(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^N \sum_{m=-\infty}^{\infty} P_{mi} H_m^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) e^{in\varphi_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_i}}.$$

Достоинствами описанного метода является простота алгоритмизации и программной реализации; получение сколь угодно высокой точности расчетов при учете соответствующего числа пространственных гармоник; непосредственная применимость для произвольного взаимного положения источника излучения, рассеивателей и точки наблюдения в отличие от большинства численных методов; возможность получения информации не только о результирующем поле в системе, но и о полях, рассеиваемых отдельными элементами структуры. Основной недостаток – возможность расчета электромагнитных полей только в системах объектов, задачи дифракции на которых имеют аналитическое решение.

## 2. Верификация метода

Рассмотрим две задачи возбуждения двумерных ФК, элементы которых образуют квадратные решетки, локально плоскими волнами. В первом случае полагаем ФК состоящим из идеально проводящих цилиндров ( $n \rightarrow \infty$ ), что допустимо в пренебрежении тепловыми потерями в металле в СВЧ диапазоне, коэффициент заполнения структуры  $f = \pi a^2/d^2 = 7.85 \cdot 10^{-3}$ , период  $d = 1$  см, радиус цилиндров  $a = 0.05$  см. Количество элементов в структуре – 121 (11 на 11). Во втором – считаем диэлектрическую проницаемость элементов  $\varepsilon = 9$  (оксид алюминия  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), коэффициент заполнения структуры  $f = 12.56 \cdot 10^{-2}$ ,  $d = 1$  см,  $a = 0.2$  см. Количество элементов – 361 (19 на 19). На рис. 3 (а) и (б) представлены спектры пропускания таких ФК, рассчитанные с использованием метода самосогласованных уравнений.

Спектры определялись в направлении распространения ГХ в пространстве волновых векторов или, используя понятие двумерных индексов Миллера, в направлении (10). Ломаная линия на рис. (а) описывает полученные автором экспериментальные данные по прохождению волн через металлический ФК в СВЧ диапазоне. Рис. 3 (в) и (г) иллюстрируют рассчитанные методом разложения по плоским волнам [13] дисперсионные диаграммы обоих рассматриваемых ФК.



**Рис. 3.** (а, б) – плавные кривые – рассчитанные спектры пропускания металлического и диэлектрического ФК соответственно, ломаная кривая на рис. (а) отображает результаты экспериментов; (в, г) – дисперсионные диаграммы, соответствующие металлической и диэлектрической структурам, где Г, X, М – точки высокой симметрии, ограничивающие неприводимую зону Бриллюэна в пространстве волновых векторов, полные запрещенные зоны указаны выделенными цветом прямоугольными областями, пунктирными линиями на рис. (в) обозначена неполная запрещенная зона в направлении ГХ.

Хорошее согласие между теоретически и экспериментально полученными данными, а также наблюдаемое соответствие частотных диапазонов формирования как полных, так и неполных запрещенных зон ФК, определенных разными методами, позволяют сделать вывод об адекватности получаемых методом самосогласованных уравнений результатов реальным электродинамическим характеристикам двумерных ФК.

## Заключение

В работе рассмотрен один из методов решения задач дифракции волн на больших совокупностях рассеивателей, позволяющий определять спектральные характеристики таких систем при произвольном положении источника и точки наблюдения поля, пространственное распределение интенсивности поля в системе, амплитудно-фазовые характеристики излучения, формируемого как всей совокупностью рассеивателей, так и отдельными элементами структуры и т.д. Работоспособность и эффективность метода подтверждена сопоставлением полученных с его помощью результатов с экспериментальными данными



и другими теоретическими подходами. Ограничением описываемого метода является необходимость существования аналитических решений задач рассеяния волн на отдельных элементах рассматриваемой системы.

### Список литературы

1. Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics // Physical Review Letters. 1987. Vol. 58. No. 20. Pp. 2059-2062.  
DOI: [10.1103/PhysRevLett.58.2059](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.2059)
2. Vetrov S.Ya., Pankin P.S., Timofeev I.V. The optical Tamm states at the interface between a photonic crystal and a nanocomposite containing core-shell particles // J. of Optics. 2016. Vol. 18. No. 6. P. 065106. DOI: [10.1088/2040-8978/18/6/065106](https://doi.org/10.1088/2040-8978/18/6/065106)
3. Шабанов В.Ф., Ветров С.Я., Шабанов А.В. Оптика реальных фотонных кристаллов. Новосиби.: Изд-во СО РАН, 2005. 239 с.
4. Noda S., Fujita M., Asano T. Spontaneous-emission control by photonic crystals and nanocavities // Nature Photonics. 2007. Vol. 1. No. 8. Pp. 449-458.  
DOI: [10.1038/nphoton.2007.141](https://doi.org/10.1038/nphoton.2007.141)
5. Photonic crystals: Towards nanoscale photonic devices / J.-M. Lourtioz a.o. 2nd ed. B.: Springer, 2008. 514 p.
6. Jin J.-M., Riley D.J. Finite element analysis of antennas and arrays. Hoboken: Wiley, 2009. 435 p.
7. Nagra A.S., York R.A. FDTD analysis of wave propagation in nonlinear absorbing and gain media // IEEE Trans. on Antennas and Propagation. 1998. Vol. 46. No. 3. Pp. 334-340.  
DOI: [10.1109/8.662652](https://doi.org/10.1109/8.662652)
8. Twersky V. Multiple scattering of radiation by an arbitrary configuration of parallel cylinders // J. of the Acoustical Soc. of America. 1952. Vol. 24. No. 1. Pp. 42-46.  
DOI: [10.1121/1.1906845](https://doi.org/10.1121/1.1906845)
9. Иванов Е.А. К решению задачи о дифракции плоской волны на двух круговых цилиндрах в случае коротких волн // Радиотехника и электроника. 1966. Т. 11. № 5. С. 931-942.
10. Ветлужский А.Ю., Ломухин Ю.Л., Михайлова О.Г. Эффект прозрачности объемных решеток // Радиотехника и электроника. 1998. Т. 43. № 7. С. 797-799.
11. You-Yu Chen, Zhen Ye. Acoustic attenuation by two-dimensional arrays of rigid cylinders // Physical Review Letters. 2001. Vol. 87. No. 18. P. 184301.  
DOI: [10.1103/PhysRevLett.87.184301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.184301)
12. Корн Г.А., Корн Т.М. Справочник по математике для научных работников и инженеров: пер с англ. 2-е изд. М.: Наука, 1970. 720 с. [Korn G.A., Korn T.M. Mathematical handbook for scientists and engineers. N.Y.: McGraw-Hill, 1961. 943 p.].  
Лозовик Ю.Л., Эйдерман С.Л. Зонная структура сверхпроводящих фотонных кристаллов // Физика твердого тела. 2008. Т. 50. № 11. С. 1944-1947.



## Self-consistent Equation Method for Solving Problems of Wave Diffraction on Scatter Systems

A.Y. Vetluzhsky<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Institute of Physical Materials Science, Siberian Branch of the  
Russian Academy of Sciences, Ulan-Ude, Russia

\* [vay@ipms.bscnet.ru](mailto:vay@ipms.bscnet.ru)

---

**Keywords:** numerical methods; diffraction; scattering; photonic crystals; transmission spectra

---

Received: 15.11.2020, Revised: 29.11.2020

---

The paper considers one of the numerical methods to solve problems of scattering electromagnetic waves on the systems formed by parallel-oriented cylindrical elements – two-dimensional photonic crystals. The method is based on the classical partition approach used for solving the wave equation. The method principle is to represent the field as the sum of the primary field and the unknown secondary field scattered on the medium elements. The mathematical expression for the latter is written as the infinite series according to elementary wave functions with unknown coefficients. In particular, the  $N$  elements-scattered field is found as the sum of  $N$  diffraction series in which one of the series is composed of the wave functions of one body and the wave functions in the remaining series are expressed in terms of the eigenfunctions of the first body using addition theorems. Further, to meet the boundary conditions, on the surface of each element, we obtain systems of linear algebraic equations with the infinite number of unknowns – the required expansion coefficients, which are solved by standard methods. A feature of the method is the use of analytical expressions to describe diffraction on a single element of the system. In contrast to most numerical methods, this approach allows one to obtain information on the amplitude-phase or spectral characteristics of the field only at the local points of the structure. The high efficiency of this method stems from the fact that there is no need to determine the field parameters in the entire area of space occupied by the multi-element system under consideration. The paper compares the calculated results of the transmission spectra of two-dimensional photonic crystals using the considered method with the experimental data and numerical results, obtained by other approaches, and demonstrates their good agreement.



## References

1. Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Physical Review Letters*, 1987, vol. 58, no. 20, pp. 2059-2062.  
DOI: [10.1103/PhysRevLett.58.2059](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.2059)
2. Vetrov S.Ya., Pankin P.S., Timofeev I.V. The optical Tamm states at the interface between a photonic crystal and a nanocomposite containing core-shell particles. *J. of Optics*, 2016, vol. 18, no. 6, p. 065106. DOI: [10.1088/2040-8978/18/6/065106](https://doi.org/10.1088/2040-8978/18/6/065106)
3. Shabanov V.F., Vetrov S.Ya., Shabanov A.V. *Optika real'nykh fotonnykh kristallov* [Optics of real photonic crystals]. Novosibirsk, 2005. 239 p. (in Russian).
4. Noda S., Fujita M., Asano T. Spontaneous-emission control by photonic crystals and nanocavities. *Nature Photonics*, 2007, vol. 1, no. 8, pp. 449-458.  
DOI: [10.1038/nphoton.2007.141](https://doi.org/10.1038/nphoton.2007.141)
5. Photonic crystals: Towards nanoscale photonic devices / J.-M. Lourtioz a.o. 2nd ed. B.: Springer, 2008. 514 p.
6. Jin J.-M., Riley D.J. Finite element analysis of antennas and arrays. Hoboken: Wiley, 2009. 435 p.
7. Nagra A.S., York R.A. FDTD analysis of wave propagation in nonlinear absorbing and gain media. *IEEE Trans. on Antennas and Propagation*, 1998, vol. 46, no. 3, pp. 334-340.  
DOI: [10.1109/8.662652](https://doi.org/10.1109/8.662652)
8. Twersky V. Multiple scattering of radiation by an arbitrary configuration of parallel cylinders. *J. of the Acoustical Soc. of America*, 1952, vol. 24, no. 1, pp. 42-46.  
DOI: [10.1121/1.1906845](https://doi.org/10.1121/1.1906845)
9. Ivanov E.A. Solving the problem of diffraction of a plane wave on two circular cylinders in the case of short waves. *Radiotekhnika i elektronika* [Radiotechnics and Electronics], 1966, vol. 11, no. 5, pp. 931-942 (in Russian).
10. Vetluzhskii A.Yu., Lomukhin Yu.L., Mikhailova O.G. Transparency effect of bulk gratings. *J. of Communications Technology and Electronics*, 1998, vol. 43, no. 7, pp. 739-741.
11. You-Yu Chen, Zhen Ye. Acoustic attenuation by two-dimensional arrays of rigid cylinders. *Physical Review Letters*, 2001, vol. 87, no. 18, p. 184301.  
DOI: [10.1103/PhysRevLett.87.184301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.184301)
12. Korn G.A., Korn T.M. *Mathematical handbook for scientists and engineers*. N.Y.: McGraw-Hill, 1961. 943 p. (Russ. ed.: Korn G.A., Korn T.M. *Spravochnik po matematike dlia nauchnykh rabotnikov i inzhenerov*. 2-e izd. Moscow: Nauka Publ., 1970. 720 p.).
13. Lozovik Yu.E., Eiderman S.L. Band structure of superconducting photonic crystals. *Physics of the Solid State*, 2008, vol. 50, no. 11, pp. 2024-2027. DOI: [10.1134/S1063783408110048](https://doi.org/10.1134/S1063783408110048)